

# 复杂磁结构的中子散射研究：机遇与挑战 \*

胡冬梅<sup>1),2)</sup> 邓司浩<sup>1),2)†</sup> 孙莹<sup>4)†</sup> 康乐<sup>1),2)</sup> 史可文<sup>3),5)</sup>  
何伦华<sup>2),6)</sup> 王聪<sup>3),5)†</sup>

1) (中国科学院高能物理研究所, 北京 100049)

2) (散裂中子源科学中心, 东莞 523803)

3) (北京航空航天大学, 集成电路科学与工程学院, 北京 100191)

4) (北京航空航天大学, 物理学院, 北京 100191)

5) (杭州市北京航空航天大学国际创新学院, 自旋芯片与技术全国重点实验室, 杭州 311115)

6) (中国科学院物理研究所, 北京 100190)

中子凭借其内禀磁矩、匹配的探针尺度 (波长 Å、能量 meV) 及强穿透能力, 使其散射技术成为在原子尺度上解析材料静态磁结构与动态磁激发的关键实验手段。近年来, 量子材料中非常规磁结构的探索对表征技术提出了更高要求。中子散射在解析复杂磁结构、探测磁激发动力学等方面具有独特优势, 已成为该领域不可或缺的研究工具。然而, 中子源强度、极端条件兼容性和数据解析复杂性等因素在一定程度上限制了其在新型量子材料精细表征中的应用。本文介绍了中子散射技术在磁性材料研究中的发展和应用, 分析了其独特贡献与现存挑战, 并结合新一代中子源设施的发展, 展望该领域的未来研究方向。

**关键词:** 中子散射, 磁结构, 磁性材料

**PACS:** 61.05.F-, 75.25.-j, 75.50.-y, 61.05.fm

\* 广东省基础与应用基础研究基金 (批准号: 2025B1515020087)、国家自然科学基金 (批准号: 52272264, 52371190) 和叶铭汉公益发展项目 (批准号: X21520608)。

† 通信作者. E-mail: dengsh@ihep.ac.cn (通信作者)

† 通信作者. E-mail: sunying@buaa.edu.cn (通信作者)

† 通信作者. E-mail: congwang@buaa.edu.cn (通信作者)

# 1 引言

中子散射技术是一种利用中子与物质相互作用探测材料微观结构的实验方法。中子独特的物理特性（不带电荷、具有磁矩、对轻元素敏感）使其成为凝聚态物理和材料科学领域不可或缺的研究手段。中子通常在核反应堆或散裂源中产生<sup>[1]</sup>。根据探测信息的不同，中子散射技术主要包括弹性散射（如中子衍射、中子全散射、中子漫散射、小角散射以及中子反射等）和非弹性散射。弹性散射用于解析材料的静态结构（包括晶体结构和磁结构），而非弹性散射则用于探测材料的动力学行为（如声子、磁子等元激发）<sup>[2]</sup>。与 X 射线和电子衍射相比，中子散射的最大优势之一在于能够直接探测材料的磁有序结构，为理解磁性材料的微观机制提供了关键信息。此外，中子散射对氢、氮、氧等轻元素以及邻近元素具有独特的探测能力，能够为其他散射技术（如 X 射线和电子衍射）提供重要的互补信息。

近年来，随着量子材料研究的深入，复杂磁结构及其伴生的新奇物理效应日益成为凝聚态物理的研究焦点<sup>[3,4]</sup>。复杂磁结构泛指磁有序材料中具有特定空间对称性的自旋排列构型，据磁矩的空间分布特征主要可分为以下三类，（1）共线磁结构：所有磁矩沿同一轴线平行或反平行排列，例如共线反铁磁、共线铁磁以及共线亚铁磁等；（2）非共线磁结构：磁矩位于同一平面内但彼此夹角非零，例如三角磁序、螺旋磁序及扇形磁序等；（3）非共面磁结构：磁矩在三维空间中分布且不共面，如锥形磁序、斯格明子晶格、多重- $\mathbf{q}$  磁序等<sup>[5,6]</sup>。这些磁结构往往具有非平庸的拓扑性质，并伴随多铁性、巨磁阻、拓扑霍尔效应等新奇现象，对其精确表征是理解量子材料物性的关键。中子散射技术——特别是中子衍射——在解析复杂自旋构型以及磁激发动力学方面展现出不可替代的优势<sup>[7-11]</sup>。然而，受限于中子源强度、极端条件兼容性以及数据解析的复杂性，该技术在新型量子材料的精细磁结构表征时仍面临诸多挑战。本文旨在介绍中子散射技术在磁性材料研究中的前沿应用，重点分析其在复杂磁结构解析中的独特贡献与现存瓶颈，并结合新一代中子源设施的发展趋势，对该领域的未来研究方向进行展望。

## 2 复杂磁结构研究的意义与技术现状

复杂磁结构的研究是理解量子材料物性（如拓扑磁相变和非共线磁序等）的关键。大量研究表明，非共线/非共面磁结构、螺旋与锥形磁结构、以及具有手性或拓扑特征的磁结构，常常伴随着拓扑磁相变、多铁性等非常规现象的产生，并可通过自旋—轨道耦合与交换相互作用进一步影响输运响应、磁电耦合及拓扑相关效应等宏观物性。因此，复杂磁结构的精确表征为揭示微观相互作用机制与宏观关联效应提供了关键切入点。中子散射技术通过中子与材料原子核与磁的相互作用，能够同时探测材料的晶体结构、磁结构

# 复杂磁结构

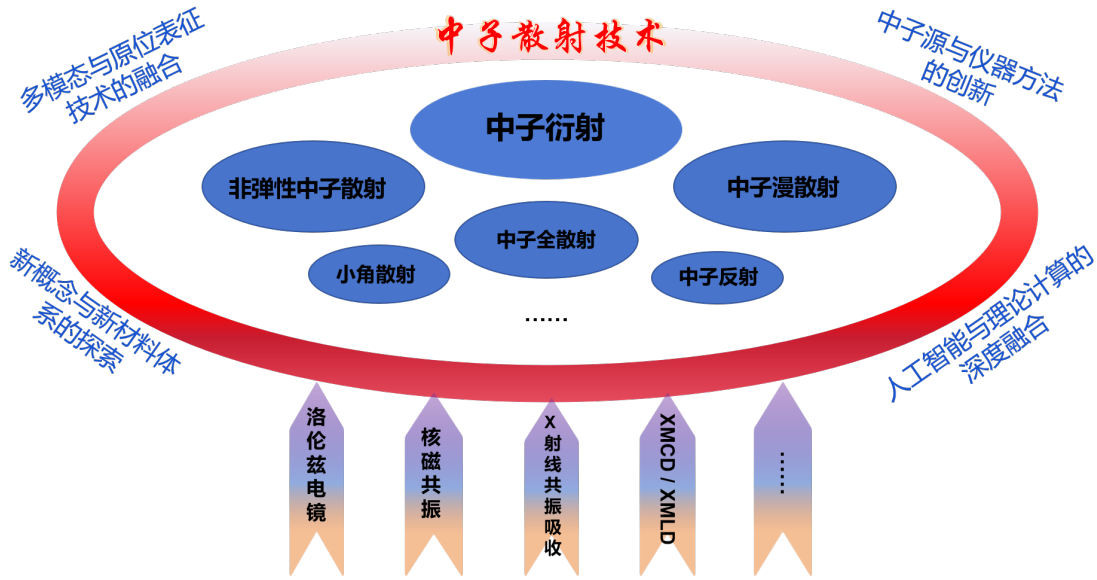


图 1 复杂磁结构的研究与展望。

Fig. 1. Research and prospects of complex magnetic structures.

和磁激发行为，特别适用于研究非共线磁序<sup>[7]</sup>。近年来，基于散裂中子源和反应堆中子源的中子衍射与非弹性中子散射技术取得了显著突破。例如，对自旋  $S = 1$  的三角晶格材料  $\text{Na}_2\text{BaNi}(\text{PO}_4)_2$  的中子散射研究<sup>[12]</sup>，直接观察到了双磁子束缚态的玻色-爱因斯坦凝聚，为探索新型量子态提供了全新视角。随着中国散裂中子源（China Spallation Neutron Source, CSNS）<sup>[13]</sup>、中国先进研究堆（China Advance Research Reactor, CARR）<sup>[14]</sup> 以及中国绵阳研究堆（China Mianyang Research Reactor, CMRR）<sup>[15]</sup> 等大科学装置的建成投运，进一步推动了复杂磁结构的研究，为多学科交叉研究提供了支撑平台。在静态磁结构表征方面，粉末与单晶中子衍射已发展出较为成熟的实验与精修流程，可在对称性约束下对长程磁有序进行定量解析；对于存在各向异性散射或多畴效应的体系，单晶衍射提供了更丰富的  $\mathbf{Q}$  空间信息，有助于提高结构判定的可靠性。与此同时，漫散射与全散射方法的应用使得对短程磁关联、低维磁涨落以及无序背景下的局域磁结构表征成为可能，从而将研究对象由“长程有序”拓展至更广泛的关联体系。另一方面，非弹性中子散射在复杂磁结构研究中日益重要，其通过直接测量  $S(\mathbf{Q}, \omega)$  实现对磁激发谱的系统表征，为提取交换相互作用参数、磁各向异性与自旋能隙等关键物理量奠定了实验基础，并推动了从“结构描述”向“机制解析”的深化。数据与软件方面，中子散射的数据归约、结构精修与谱学拟合已形成较成熟的工具链，依托 FullProf<sup>[16]</sup>、GSAS<sup>[17]</sup> 以及 GSAS-II<sup>[18]</sup> 等常用精修软件，可在对称性约束下开展磁结构精修与多模型比较，支持从原始计数到物理量提取的标准化流程；同时，高性能计算的普及推动了大参数空间

搜索、跨数据集联合拟合与多模型对比分析，使复杂磁结构解析由“单一模型拟合”逐步转向“多证据约束下的模型选择”。近年来，机器学习在散射图样特征提取、候选模型筛选与参数初值估计等环节展现出潜力，为提升复杂体系解析效率提供了新的技术路径。

### 3 中子散射技术的前沿应用

#### 3.1 非共线磁结构与拓扑磁性的中子散射研究

中子衍射作为弹性散射技术，在揭示非共线磁结构方面具有独特优势，已成为研究拓扑磁性材料的核心实验手段。通过精确测定磁布拉格峰的位置和强度，中子衍射能够直接确定磁矩的空间排列方式，包括非共线磁序、螺旋磁序、斯格明子等复杂磁结构，为理解磁性材料的微观起源和调控机制提供关键信息<sup>[19-21]</sup>。在反钙钛矿材料中，Mn 基化合物展现出丰富的非共线磁序类型，研究者能够精确确定这些磁结构，进而建立非共线磁结构与反常热膨胀、磁卡等物性之间的定量关联<sup>[22]</sup>。稀土硫族化合物中，单晶中子衍射研究揭示了正交晶系 ErAsS 中从顺磁态经中间非共度磁态到共线反铁磁基态的磁相变过程，并结合角分辨光电子能谱证实了磁序调控下从拓扑晶体绝缘体到平凡绝缘体的拓扑相变<sup>[23]</sup>。非弹性中子散射技术在双层镍氧化物  $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_{7-\delta}$  的研究中揭示了独特的强层间磁交换耦合特征<sup>[24]</sup>，为理解高温超导机制提供了关键实验依据。极化中子反射技术的发展使得纳米尺度磁结构的层分辨探测成为可能<sup>[25]</sup>。斯格明子晶格作为典型的拓扑非共线磁结构，因其受拓扑保护的涡旋状自旋织构而受到广泛关注。小角中子散射技术凭借其对纳米尺度磁结构调制的高灵敏度，在 B20 型手性磁体 MnSi 中通过观测特征性的六重对称衍射斑点，直接证实了斯格明子相的存在<sup>[26]</sup>。极化中子散射实验进一步区分了布洛赫型和奈尔型斯格明子，并定量测定了 Dzyaloshinskii-Moriya 相互作用强度<sup>[27]</sup>，为理解斯格明子的拓扑霍尔效应等独特输运性质提供了实验基础。

#### 3.2 交错磁体的中子散射表征

交错磁体是近年来发现的一类超越传统铁磁体和反铁磁体的新型磁性材料<sup>[28]</sup>。尽管其具有补偿性共线磁构型，但电子能带结构中表现出非相对论性自旋分裂，使其兼具铁磁体的时间反演对称性破缺磁响应和反铁磁体的杂散场可忽略、抗干扰及太赫兹动力学特性<sup>[29]</sup>。这种“磁性二象性”使得传统磁性探测手段面临困难：宏观磁化测量无法区分交错磁体与普通反铁磁体，而角分辨光电子能谱虽能观测自旋劈裂，但无法直接确定实空间磁结构。中子散射技术凭借其对原子磁矩和晶体对称性以及自旋动力学的精确表征

能力，成为鉴定交错磁体的关键实验手段之一。交错磁体的材料体系呈现出显著的多样性，已报道的候选材料涵盖了金属间化合物 ( $\text{MnTe}$ ,  $\text{MnTe}_2$ ,  $\text{CrSb}$ )、层状金属氧化物 ( $\text{Rb}_{1-\delta}\text{V}_2\text{Te}_2\text{O}$ )、过渡金属卤化物 ( $\text{MnF}_2$ )、钙钛矿结构等多种体系 [30-36]。这些材料为系统研究晶体对称性、磁交换作用与交错磁性的内在关联提供了理想平台。在交错磁体的中子散射研究中，弹性中子衍射主要用于确定磁结构、磁相变以及自旋对称性分析，而非弹性中子散射则通过测量自旋波色散关系揭示其独特的自旋动力学特征。例如，Liu 等人 [37] 通过高分辨率非弹性中子散射实验在  $\text{MnTe}$  中直接观测到交错磁体特有的磁振子劈裂现象，证实了其磁振子的手性劈裂源于对称交换作用，为交错磁性的微观机制提供了直接实验证据。因此，中子散射技术（包括弹性衍射和非弹性散射）在交错磁体的发现、表征和机制研究中发挥了不可替代的核心作用。

### 3.3 量子磁性 with 单分子磁体的中子散射研究

单分子磁体作为由单个分子构成的磁性单元，展现出独特的宏观量子隧穿效应和磁滞行为，是实现高密度量子信息存储和量子计算的理想候选体系 [38,39]。精确测定磁各向异性轴的方向对于理解磁弛豫机制、优化量子相干时间以及理性设计高性能单分子磁体至关重要。非弹性中子散射可直接测量磁激发能谱、晶格场劈裂以及磁交换相互作用 [40-42]，避免了光谱学方法中选择定则的限制。近年来，3d-4f 异金属配合物的引入为破解磁各向异性轴测定难题提供了突破性策略。通过将强磁散射的 3d 离子（如  $\text{Fe}^{3+}$ ）与 4f 离子组装成异金属簇合物，可显著提升整体散射强度，通过分析耦合体系的能级结构间接标定 4f 离子的各向异性轴方向 [43]。这一化学设计策略推动单分子磁体研究从“试错式筛选”向“参数可控的理性设计”转变，为下一代高性能分子量子比特和自旋电子学器件奠定了微观物理基础。

### 3.4 非常规超导体磁激发的中子散射研究

非常规超导体的配对机制与磁激发行为密切相关。中子散射技术在铜基和铁基超导体中发现了与超导共存的磁共振峰，其能量与超导能隙相关 [44,45]。在铁基超导体研究中，中子自旋共振通常被认为是理解非常规超导体中磁介导的库珀对的关键 [46]，其动态磁化率在超导转变温度以下的特定能量和动量处表现出尖锐的峰 [47]。通过系统研究不同铁基超导体中自旋共振的能量、动量分布和温度依赖性，可深入理解其物理本质和配对对称性。近年来，新型非常规超导体的发现为中子散射研究开辟了新方向。在双层镍氧化物  $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_{7-\delta}$  中观测到低能自旋激发和约 45 meV 的平坦高能模式，揭示了强层间磁性耦合、弱层内的条纹反铁磁序图像 [24]，为理解镍氧化物的配对机制提供了重要参考。新一代中子源（如美国散

裂中子源第二靶站 (Spallation Neutron Source Second Target Station, SNS STS) [48]、欧洲散裂中子源 (European Spallation Source, ESS) [49] 和中国散裂中子源二期工程 (China Spallation Neutron Source Phase II, CSNS-II) [13] 将提供通量提升, 结合缪子自旋弛豫、共振非弹性 X 射线散射等互补技术 [50], 有望在更多新型超导体系统中建立磁激发与超导配对之间的确定性关联。

## 4 技术挑战

尽管中子散射技术在复杂磁结构表征中具有不可替代的优势, 但在弱磁信号获取、分辨率与通量平衡、强吸收体系测量、极端条件原位实验以及数据归约与反演等方面仍面临关键瓶颈。其根源不仅来自中子散射实验在通量、探测效率和样品环境兼容性等方面的客观限制, 也与复杂磁结构常涉及多传播矢量、多磁畴、短程关联与长程有序并存等特征有关, 从而增加了实验判定与模型反演的复杂性。这些问题的突破依赖于中子源与谱仪性能提升、样品与样品环境工程优化, 以及数据分析方法学的协同创新。

### 4.1 信号强度

中子散射信号较弱是复杂磁结构研究面临的主要瓶颈之一, 尤其是在粉末样品、稀土或强关联体系, 以及小磁矩或弱调制磁结构 (如小倾角、次级传播矢量分量) 中更为突出。除磁散射本身较弱外, 中子源通量相对有限也进一步限制了单位时间内可获得的有效计数, 使得弱散射、微小样品和快速动力学测量更容易受到信噪比不足和时间分辨受限的制约。围绕这一问题, 高功率散裂源与高效率探测体系正持续发展。例如, CSNS 正在推进的二期工程 (CSNS-II), 计划将束流功率从当前的 185 kW 提升至 500 kW [51], 以提升有效通量并拓展谱仪覆盖范围, 从而支撑动态过程的快速数据采集并增强小尺寸样品与原位表征能力。在样品制备层面, 可通过同位素替代、提高样品质量以及尽可能采用较大尺寸的单晶样品等策略来增强磁信号。在探测技术层面, 极化中子方法的发展显著提高了磁散射与核散射的区分能力。同时, 高性能谱仪平台与磁结构解析方法学的进步, 也为弱磁信号的可靠提取提供了有力支撑。例如, 依托 CSNS 通用粉末衍射仪的优异性能 [52], 并结合复杂磁结构的逐步逼近精修方法, 研究人员已能够在原子尺寸上探测到 1% 的磁矩变化 [53]。

## 4.2 分辨率

复杂磁结构解析常需要分辨相近的磁散射、区分多传播矢量/多畴贡献，或追踪序参量的细微演化，因此对分辨率提出更高要求；然而衍射谱仪的分辨率与通量往往存在现实权衡：提高分辨率通常意味着降低有效通量并延长实验时间，从而反过来削弱弱磁信号的统计。针对这一矛盾，微束流技术通过中子光学聚焦实现更小、更强的束流，使得微小样品的高分辨表征成为可能，这对稀有材料和空间分辨研究具有重要意义。例如，CSNS 通用粉末衍射谱仪利用中子聚焦技术 (Kirkpatrick-Baez) 实现了高精度的应力分布测试<sup>[54]</sup>。同时，高通量源和高分辨谱仪的协同发展显著提升了探测能力，例如，CSNS 高分辨中子衍射谱仪已于 2024 年 7 月建成通束，这将为复杂磁结构及弱散射信号体系的高分辨测量提供重要支撑。

## 4.3 强吸收与高背景体系

对含强中子吸收元素（如稀土元素 Gd、Sm 等）的材料，吸收效应会引起衍射强度的衰减并带来系统性偏差，从而增加峰强定量与结构精修的不确定度。针对强吸收体系，中子衍射实验通常结合低吸收同位素富集以降低本征吸收，并采用短波长测量与低吸收路径的样品几何以减弱吸收导致的角度依赖衰减；同时在数据归约与精修中引入吸收或多重散射校正，并结合物理约束建模，以提升结构参数的可靠性。

另一方面，含氢体系的磁结构解析常受较强的漫散背景限制，由于氢原子极大的非相干散射截面 ( $\sigma_{\text{inc}} = 80.27 \text{ barn}$ , barn 为散射截面的标准单位)，易在衍射图谱中产生强烈的漫散背底，严重淹没磁布拉格峰信号，这对含氢配体的分子磁体、氢化物和有机-无机杂化材料的磁结构解析构成重大挑战。尽管氘代替可有效抑制非相干散射 (氘的  $\sigma_{\text{inc}} = 2.05 \text{ barn}$ )，但这不仅大幅增加样品制备成本和周期，且在某些体系中会引入同位素效应，影响磁性本征行为的准确表征。因此，该类体系的实验设计通常需要在“背景抑制”与“本征物性保持”之间进行权衡。

## 4.4 薄膜的磁结构表征

薄膜的磁结构解析是当前中子散射面临的重要挑战之一。相较于块体材料，这类体系的有效散射体积更小，使常规中子衍射难以获得足够的磁结构信息。极化中子反射等技术在薄膜研究中具有重要潜力，可用于解析薄膜内部沿深度方向的磁性分布，但对面内复杂自旋排布及完整磁结构模型的判定能力仍然有限。因此，薄膜磁结构研究通常需要与其他实验手段联合进行。例如，共振非弹性 X 射线散射可在自旋激发和电子关联方面提供补充信息，X 射线磁圆二色性 (X-ray magnetic circular dichroism, XMCD) 和 X

射线磁线二色性 (X-ray magnetic linear dichroism, XMLD) 等同步辐射方法则可在元素选择性磁性探测、磁各向异性和局域电子态表征方面发挥重要作用, 从而与中子技术形成互补。因此, 如何发展面向薄膜体系的高灵敏联合测量方法, 并建立统一的数据分析框架, 仍是复杂磁结构研究中待解决的关键问题。

#### 4.5 极端条件下原位表征

复杂磁结构往往在低温、高压或强磁场等极端条件下呈现, 这对原位中子衍射技术提出了更高要求, 包括样品环境的可达参数范围、几何开角、环境本底控制以及加载与测量的稳定性等。近年来, 多场耦合原位表征装置的发展, 使得在压力、温度、磁场基础上进一步叠加电场、光场等多物理场, 实现对材料微观结构演化的原位与可控研究成为可能。多场耦合极端条件技术也使材料在外场调控下呈现常规条件难以观测的新奇物态。例如, 利用中子粉末衍射技术对强关联材料的磁结构演变进行原位 (温度、磁场和压力三场耦合) 研究, 成功解析了外场驱动自旋倾斜 (spin canting) 和自旋翻转 (spin flipping) 过程, 揭示了外场对磁有序的微观调控机制<sup>[55]</sup>。此外, 仪器控制、样品环境切换和数据采集的自动化水平不断提高, 结合机器学习辅助的数据解析算法, 为更复杂、更多样化的实验设计提供了技术支撑。

#### 4.6 数据归约与算法

中子散射实验旨在探测材料的结构和动力学特性, 但这些信息无法直接从散射数据中获取, 需借助原子、自旋模型进行间接解析。典型的分析流程包括: 构建结构模型、模拟中子散射结果、与实验数据对比拟合, 进而推断材料的微观结构与动力学行为。为支撑这一过程, 除传统的分子动力学和蒙特卡罗模拟软件外<sup>[56-58]</sup>, 已发展出多种专用于中子散射数据分析的计算工具。当前, 高性能计算和先进仿真算法显著提升了数据解读能力, 而机器学习方法的应用则为复杂散射模式的识别和模型参数优化提供了新途径<sup>[59]</sup>。

### 5 未来展望与发展方向

#### 5.1 多模态与原位表征技术的融合

中子作为一种独特的探针, 与多种表征技术和理论计算相结合, 在复杂磁结构解析中发挥着越来越重要的作用。不同表征技术因探测对象、可观测量及时空尺度不同, 通常需围绕具体科学问题进行协同设计, 以实现复杂磁结构及其演化机制的交叉验证。其中, 中子衍射能够直接探测长程磁有序, 是确定磁结构对称性、传播矢量和自旋排布方式的核心手段。全散射和对分布函数 (Pair Distribution Function, PDF)

分析能够在缺乏长程周期性的情况下揭示局域结构畸变，而磁对分布函数（magnetic Pair Distribution Function, mPDF）进一步分离磁散射贡献，通过磁自旋对关联函数  $d(r)$  在亚纳米尺度探测短程磁关联的空间范围 and 对称性<sup>[60,61]</sup>。漫散射分析聚焦于布拉格峰之外的连续散射强度，捕获磁涨落和自旋关联信息。非弹性中子散射技术通过测量能量-动量转移，直接探测磁激发谱，定量给出微观磁相互作用参数。这些技术的联合使用能够构建从长程有序到局域涨落、从静态结构到动态激发的多维表征框架，多模态数据的交叉验证为复杂磁基态的确认提供了决定性证据。

未来复杂磁结构研究将更加注重中子散射与其他表征技术的深度融合。中子散射与同步辐射 X 射线技术的结合具有天然互补性：XMCD 利用元素选择性，通过 sum rule 分析定量分离特定元素的自旋磁矩和轨道磁矩及其各向异性<sup>[62]</sup>；共振非弹性 X 射线散射通过探测磁振子等自旋激发，直接获取材料的磁相互作用和动力学信息。缪子自旋弛豫对磁转变温度和皮秒-纳秒时间尺度的磁涨落极为敏感，可作为中子散射的有效补充；核磁共振提供原子尺度的局域磁环境和超精细相互作用信息；洛伦兹透射电镜在实空间直接成像纳米尺度磁畴结构。这种多技术协同能够在不同时空尺度和能量尺度上构建材料磁性的完整物理图像。

## 5.2 新概念与新材料体系的探索

随着交错磁体等新概念的出现，以及非传统磁结构等前沿领域的持续热度，中子散射将在验证新物理概念和探索新材料方面发挥关键作用。极化中子非弹性散射在交错磁体表征中展现出独特优势：通过测量磁振子的手征性（chirality），可直接验证交错磁序的本质特征。最近对  $\text{MnF}_2$  的极化中子研究<sup>[35]</sup>首次直接观测到了交错磁体中磁振子带的手征性分裂——两支磁振子模式的中子散射截面呈现相反符号的非零手征性，这一特征明确区分了交错磁体与传统反铁磁体。该研究揭示了这种曾被视为典型反铁磁体的材料实际上具有交错磁性，凸显了极化中子散射对磁振子谱精细结构的优势。这一发现为利用极化中子技术系统表征候选交错磁体、理解其微观磁相互作用机制提供了范例。

## 5.3 人工智能与理论计算的深度融合

第一性原理计算、原子级磁结构模拟与中子散射实验的紧密结合，将大大提升复杂磁结构的解析精度和效率。人工智能技术的引入有望解决逆散射问题中的多解性难题，实现从散射数据到磁结构的快速重建。与此同时，面向复杂磁结构研究的磁序数据库、解析软件与标准化数据流程建设仍需进一步加强，并与人

工智能、大数据方法深度结合，从硬件、软件和人才三个维度协同提升相关研究能力。随着量子计算的发展，未来甚至可能实现对复杂磁性体系的精确量子模拟，为预测新颖量子磁现象提供新途径。

## 5.4 中子源与仪器方法的创新

中子散射仪器与方法的持续创新是推动领域发展的根本动力。中国散裂中子源二期工程的建设将显著提升中国在复杂磁结构研究领域的国际竞争力：束流功率从 185 kW 提升至 500 kW，中子通量的增长将使弱磁信号探测和小样品测量成为常规能力；新建谱仪（尤其是单晶中子衍射仪）针对磁结构研究需求优化设计，将配备新一代高效位置灵敏探测器和丰富样品环境装置。与此同时，基于机器学习的磁结构自动解析算法、贝叶斯方法驱动的磁空间群确定程序，以及针对复杂磁有序的多维数据可视化工具的发展，将大幅提升从海量中子散射数据中提取物理信息的效率。超导磁体、稀释制冷机等极端环境装置的自主研发和集成，结合原位多场耦合测量能力，将使中子散射能够在更宽广的参数空间探索磁相图和磁结构演化，为理解量子磁性和强关联电子体系提供不可替代的实验手段。

## 6 结论

复杂磁结构的中子散射研究正处在一个充满机遇与挑战的关键时期。中子散射技术在材料研究中展现出巨大潜力，有望从结构和功能的多维视角深化对复杂磁性体系的理解，并为固态科学的发展提供新的突破口。CSNS 和先进研究堆等大科学装置的持续发展，为我国在这一领域取得原创性突破提供了历史性机遇。通过技术创新、学科交叉与国际合作，中子散射技术必将在复杂磁结构研究中发挥更加重要的作用，推动凝聚态物理与材料科学的进一步发展。

## 致谢

感谢黄清镇教授在本文撰写过程中提供的宝贵建议和指导。

## 参考文献

- [1] Willis B T M, Carlile C J 2017 *Experimental neutron scattering* (Oxford University Press)

- [2] Wang F W, Yan Q W, Liang T J, Yin W, Zhang P L, Fu S N, Tang J Y, Fang S X, Zhang Z, Zhang J 2005 *Physics* **34** 731. (in Chinese) [王芳卫, 严启伟, 梁天骄, 殷雯, 张泮霖, 傅世年, 唐靖宇, 方守贤, 章综, 张杰 2005 物理 **34** 731]
- [3] Clark L, Sala G, Maharaj D D, Stone M B, Knight K S, Telling M T F, Wang X, Xu X, Kim J, Li Y, Cheong S W, Gaulin B D 2019 *Nature Physics* **15** 262
- [4] Hester G, Nair H S, Reeder T, Yahne D R, DeLazzer T N, Berges L, Ziat D, Neilson J R, Aczel A A, Sala G, Quilliam J A, Ross K A 2019 *Physical Review Letters* **123** 027201
- [5] Shen F, Zhou H, Hu F, Wang J T, Deng S, Wang B, Wu H, Huang Q, Wang J, Chen J, He L, Hao J, Yu Z, Liang F, Liang T, Sun J, Shen B 2020 *Materials Horizons* **7** 804
- [6] Kanazawa N, Kim J H, Inosov D S, White J S, Egetenmeyer N, Gavilano J L, Ishiwata S, Onose Y, Arima T, Keimer B, Tokura Y 2012 *Phys. Rev. B* **86** 134425
- [7] Yusuf S M, Kumar A 2017 *Applied Physics Reviews* **4** 031303
- [8] Ratcliff W, Lynn J W, Kiryukhin V, Jain P, Fitzsimmons M R 2016 *npj Quantum Materials* **1** 1
- [9] Fitzsimmons M, Schuller I K 2014 *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **350** 199
- [10] Zaliznyak I A, Tranquada J M 2014 In *Strongly Correlated Systems: Experimental Techniques* (Springer), pp 205–235
- [11] Furrer A, Mesot J F, Strässle T 2009 *Neutron scattering in condensed matter physics*, vol. 4 (World Scientific Publishing Company)
- [12] Sheng J, Mei J W, Wang L, Xu X, Jiang W, Xu L, Ge H, Zhao N, Li T, Candini A, Xi B, Zhao J, Fu Y, Yang J, Zhang Y, Biasiol G, Wang S, Zhu J, Miao P, Tong X, Yu D, Mole R, Cui Y, Ma L, Zhang Z, Ouyang Z, Tong W, Podlesnyak A, Wang L, Ye F, Yu D, Yu W, Wu L, Wang Z 2025 *Nature Materials* **24** 544
- [13] Chen H, Chen Y, Fu S, Ma L, Wang S, Chen F, Chen Y, Dong H, Dong L, Feng G, Gu J, He L, He K, He W, Hu C, Huang J, Ji Q, Jia X, Jin D, Kang L, Kang W, Liang T, Lin G, Liu H, Li J,

- Ouyang H, Qi F, Qi X, Qu H, Sun H, Sun Z, Shen L, Tang J, Tao J, Wang F, Wang L, Wang P, Wang Q, Wu Y, Xi J, Xu T, Yin W, Zhang B, Zhang J, Zhang J, Zhang S, Zhao J, Zhao L, Zhao Y, Zhou M, Zhu T, Zhuang J 2025 *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* **1078** 170431
- [14] Chen D F, Wu M M, Gao J X, Yao Y G, Li T F, Sun K, Jiao X S, Hao L J, Ma X B, Li M J, He L F, Wang Z J, Xiao C J, Liu X L, Guo H, Li Z Y, Wang H L, Liu R D, Yan S B, Zhao L, Yu J L, Zhang H Q 2025 *Atomic Energy Science and Technology* **59** 1792. (in Chinese) [陈东风, 武梅梅, 高健翔, 姚永刚, 李天富, 孙凯, 焦学胜, 郝丽杰, 马小柏, 李眉娟, 贺林峰, 王子军, 肖才锦, 刘晓龙, 郭浩, 李正耀, 王洪亮, 刘荣灯, 闫士博, 赵梁, 余俊龙, 张焕乔 2025 原子能科学技术 **59** 1792]
- [15] SUN G, LIU D, GONG J, PENG S 2021 *Scientia Sinica Physica, Mechanica & Astronomica* **51** 092009
- [16] Rodriguez-Carvajal J, Gonzalez-Platas J, Katcho N A 2025 *Acta Crystallographica Section B* **81** 302
- [17] Cui J, Huang Q, Toby B 2006 *Powder diffraction* **21** 71
- [18] Toby B H 2001 *Applied Crystallography* **34** 210
- [19] Pomjakushin V, Plokhikh I, White J, Fujishiro Y, Kanazawa N, Tokura Y, Pomjakushina E 2023 *Physical Review B* **107** 024410
- [20] Ding L, Hu C, Ye F, Feng E, Ni N, Cao H 2020 *Physical Review B* **101** 020412
- [21] Fujishiro Y, Kanazawa N, Nakajima T, Yu X Z, Ohishi K, Kawamura Y, Kakurai K, Arima T, Mitamura H, Miyake A, Akiba K, Tokunaga M, Matsuo A, Kindo K, Koretsune T, Arita R, Tokura Y 2019 *Nature Communications* **10** 1059
- [22] Deng S, Wang H, He L, Wang C 2023 *Microstructures* **3** 2023044
- [23] Chen H, Gao J, Chen L, Wang G, Li H, Wang Y, Liu J, Wang J, Geng D, Zhang Q, Sheng J, Ye F, Qian T, Chen L, Weng H, Ma J, Chen X 2022 *Advanced Materials* **34** 2110664
- [24] Xie T, Huo M, Ni X, Shen F, Huang X, Sun H, Walker H C, Adroja D, Yu D, Shen B, He L, Cao K, Wang M 2024 *Science Bulletin* **69** 3221

- [25] Bai H, Zhan X Z, Li G, Su J, Zhu Z Z, Zhang Y, Zhu T, Cai J W 2019 *Applied Physics Letters* **115** 182401
- [26] Mühlbauer S, Binz B, Jonietz F, Pfleiderer C, Rosch A, Neubauer A, Georgii R, Böni P 2009 *Science* **323** 915
- [27] Adams T, Mühlbauer S, Neubauer A, Münzer W, Jonietz F, Georgii R, Pedersen B, Boni P, Rosch A, Pfleiderer C 2012 *Physical Review Letters* **108** 237204
- [28] Šmejkal L, Sinova J, Jungwirth T 2022 *Physical Review X* **12** 031042
- [29] Jungwirth T, Marti X, Wadley P, Wunderlich J 2016 *Nature nanotechnology* **11** 231
- [30] Lee S, Lee S, Jung S, Jung J, Kim D, Lee Y, Seok B, Kim J, Park B G, Šmejkal L, Kang C J, Kim C 2024 *Physical Review Letters* **132** 036702
- [31] Mazin I 2023 *Physical Review B* **107** L100418
- [32] Zhu Y P, Chen X, Liu X R, Liu Y, Liu P, Zha H, Qu G, Hong C, Li J, Jiang Z, Ma X M, Hao Y J, Zhu M Y, Liu W, Zeng M, Jayaram S, Lenger M, Ding J, Mo S, Tanaka K, Arita M, Liu Z, Ye M, Shen D, Wrachtrup J, Huang Y, He R H, Qiao S, Liu Q, Liu C 2024 *Nature* **626** 523
- [33] Ding J, Jiang Z, Chen X, Tao Z, Liu Z, Li T, Liu J, Sun J, Cheng J, Liu J, Yang Y, Zhang R, Deng L, Jing W, Huang Y, Shi Y, Ye M, Qiao S, Wang Y, Guo Y, Feng D, Shen D 2024 *Physical Review Letters* **133** 206401
- [34] Zhang F, Cheng X, Yin Z, Liu C, Deng L, Qiao Y, Shi Z, Zhang S, Lin J, Liu Z, Ye M, Huang Y, Meng X, Zhang C, Okuda T, Shimada K, Cui S, Zhao Y, Cao G H, Qiao S, Liu J, Chen C 2025 *Nature Physics* **21** 760
- [35] Faure Q, Bounoua D, Balédent V, Gukasov A, Garlea V O, Ribeiro A, Rau J G, Petit S, McClarty P 2025 *arXiv preprint arXiv:2509.07087*
- [36] Naka M, Motome Y, Seo H 2025 *npj Spintronics* **3** 1
- [37] Liu Z, Ozeki M, Asai S, Itoh S, Masuda T 2024 *Physical Review Letters* **133** 156702

- [38] Shao D, Wang X Y 2020 *Chinese Journal of Chemistry* **38** 1005
- [39] Bogani L, Wernsdorfer W 2008 *Nature materials* **7** 179
- [40] Dunstan M A, Mole R A, Boskovic C 2019 *European Journal of Inorganic Chemistry* **2019** 1090
- [41] Stavretis S E, Cheng Y, Daemen L L, Brown C M, Moseley D H, Bill E, Atanasov M, Ramirez-Cuesta A J, Neese F, Xue Z L 2019 *European journal of inorganic chemistry* **2019** 1119
- [42] Atkin A M, Giansiracusa M J, Calvello S, Rousset E, Gable R W, Phonsri W, Murray K S, Howard J K, Soncini A, Mole R A, Boskovic C 2023 *Inorganic Chemistry* **62** 1141
- [43] Mutschler J, Ruppert T, Peng Y, Schlittenhardt S, Schneider Y F, Braun J, Anson C E, Ollivier J, Berrod Q, Zanotti J M, Ruben M, Powell A K, Waldmann O 2025 *Cell Reports Physical Science* **6** 102848
- [44] Rossat-Mignod J, Regnault L P, Vettier C, Bourges P, Burlet P, Bossy J, Henry J Y, Lapertot G 1991 *Physica C: Superconductivity* **185-189** 86
- [45] Christianson A D, Goremychkin E A, Osborn R, Rosenkranz S, Lumsden M D, Malliakas C D, Todorov I S, Claus H, Chung D Y, Kanatzidis M G, Bewley R I, Guidi T 2008 *Nature* **456** 930
- [46] Hong W, Song L, Liu B, Li Z, Zeng Z, Li Y, Wu D, Sui Q, Xie T, Danilkin S, Ghosh H, Ghosh A, Hu J, Zhao J, Luo H 2020 *Physical Review Letters* **125** 117002
- [47] Dai P, Hu J, Dagotto E 2012 *Nature Physics* **8** 709
- [48] Haberl B, Quirinale D G, Li C W, Granroth G E, Nojiri H, Donnelly M E, Ushakov S V, Boehler R, Winn B L 2022 *Review of Scientific Instruments* **93** 083907
- [49] Garoby R, Vergara A, Danared H, Alonso I, Bargallo E, Cheymol B, Darve C, Eshraqi M, Hassan-zadegan H, Jansson A, Kittelmann I, Levinsen Y, Lindroos M, Martins C, Midttun , Miyamoto R, Molloy S, Phan D, Ponton A, Sargsyan E, Shea T, Sunesson A, Tchelidze L, Thomas C, Jensen M, Hees W, Arnold P, Juni-Ferreira M, Jensen F, Lundmark A, McGinnis D, Gazis N, Weisend II J, Anthony M, Pitcher E, Coney L, Gohran M, Haines J, Linander R, Lyngh D, Oden U, Carling

- H, Andersson R, Birch S, Cereijo J, Friedrich T, Korhonen T, Laface E, Mansouri-Sharifabad M, Monera-Martinez A, Nordt A, Paulic D, Piso D, Regnell S, Zaera-Sanz M, Aberg M, Breimer K, Batkov K, Lee Y, Zanini L, Kickulies M, Bessler Y, Ringnér J, Jurns J, Sadeghzadeh A, Nilsson P, Olsson M, Presteng J E, Carlsson H, Polato A, Harborn J, Sjögreen K, Muhrer G, Sordo F 2017 *Physica Scripta* **93** 014001
- [50] Keimer B, Kivelson S A, Norman M R, Uchida S, Zaanen J 2015 *Nature* **518** 179
- [51] Wu B, Li X, Zhang C, Liu Y, Long W, Nie X, Li X, Wu J, Zhu J, Chen S, Liu S, Lu Z, Wang S 2023 *Review of Scientific Instruments* **94** 043301
- [52] He L, Deng S, Shen F, Chen J, Lu H, Tan Z, Zheng H, Hao J, Zhao D, Ma Q 2023 *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* **1054** 168414
- [53] Deng S, Gomonay O, Chen J, Fischer G, He L, Wang C, Huang Q, Shen F, Tan Z, Zhou R, Hu Z, Šmejkal L, Sinova J, Wernsdorfer W, Sürgers C 2024 *Nature Communications* **15** 822
- [54] Hao J, Tan Z, Lu H, Deng S, Shen F, Zhao D, Zheng H, Ma Q, Chen J, He L 2023 *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* **1055** 168532
- [55] An S, Yang F, Sun Y, Deng S, Yuan X, Shi K, He L, Yuan B, Sun L, Guo J, Wang P, Sheng X, Hao W, Du Y, Huang Q, Wang C 2025 *Advanced Materials* **37** 2420502
- [56] Tucker M G, Keen D A, Dove M T, Goodwin A L, Hui Q 2007 *Journal of Physics: Condensed Matter* **19** 335218
- [57] Kühne T D, Iannuzzi M, Del Ben M, Rybkin V V, Seewald P, Stein F, Laino T, Khaliullin R Z, Schütt O, Schiffmann F, Golze D, Wilhelm J, Chulkov S, Bani-Hashemian M H, Weber V, Borstnik U, Taillefumier M, Jakobovits A S, Lazzaro A, Pabst H, Müller T, Schade R, Guidon M, Andermatt S, Holmberg N, Schenter G K, Hehn A, Bussy A, Belleflamme F, Tabacchi G, Gloß A, Lass M,

- Bethune I, Mundy C J, Plessl C, Watkins M, VandeVondele J, Krack M, Hutter J 2020 *The Journal of Chemical Physics* **152** 194103
- [58] Cheng Y Q, Daemen L L, Kolesnikov A I, Ramirez-Cuesta A J 2019 *Journal of chemical theory and computation* **15** 1974
- [59] Linker T M, Krishnamoorthy A, Daemen L L, Ramirez-Cuesta A J, Nomura K, Nakano A, Cheng Y Q, Hicks W, Kolesnikov A, Vashishta P D 2024 *Nature Communications* **15** 3911
- [60] Yang L, Kang T, Xu J, Yin W 2024 *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* **1069** 169967
- [61] Xu J, Xia Y, Li Z, Chen H, Wang X, Sun Z, Yin W 2021 *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* **1013** 165642
- [62] Stöhr J 1995 *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena* **75** 253

录用稿件，非最终出版稿

# Neutron Scattering Studies of Complex Magnetic Structures: Advances and Challenges\*

HU Dongmei<sup>1),2)</sup> DENG Sihao<sup>1),2)†</sup> SUN Ying<sup>4)†</sup> KANG Le<sup>1),2)</sup> SHI  
Kewen<sup>3),5)</sup> HE Lunhua<sup>2),6)</sup> WANG Cong<sup>3),5)†</sup>

1) (*Institute of High Energy Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China*)

2) (*China Spallation Neutron Source, Dongguan 523803, China*)

3) (*School of Integrated Circuit Science and Engineering, Beihang University, Beijing 100191, China*)

4) (*School of Physics, Beihang University, Beijing 100191, China*)

5) (*National Key Lab of Spintronics, Hangzhou International Innovation Institute, Beihang University, Hangzhou 311115, China*)

6) (*Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*)

## Abstract

Neutron scattering has emerged as a pivotal experimental technique for resolving static magnetic structures and dynamic magnetic excitations in materials at the atomic scale, owing to the intrinsic magnetic moment of neutrons, their characteristic length and energy scales (angstrom wavelengths and meV energies), and strong penetrating power. In recent years, the exploration of unconventional magnetic structures in quantum materials has imposed increasingly stringent requirements on characterization techniques. This paper reviews the development and state-of-the-art applications of neutron scattering

---

\* Project supported by Guangdong Basic and Applied Basic Research Foundation (Grant No. 2025B1515020087), National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 52272264, 52371190), Ye Minghan Public Welfare Development Project (Grant No. X21520608).

† 通信作者. E-mail: dengsh@ihep.ac.cn (通信作者)

† 通信作者. E-mail: sunying@buaa.edu.cn (通信作者)

† 通信作者. E-mail: congwang@buaa.edu.cn (通信作者)

in magnetic materials research, with particular emphasis on its unique advantages and current challenges in resolving complex magnetic orders. Specifically, elastic neutron scattering techniques (e.g., neutron diffraction, total scattering, diffuse scattering, small-angle neutron scattering, and neutron reflectometry) allow the precise determination of non-collinear, non-coplanar, helical, conical, and skyrmion-lattice magnetic structures. Inelastic neutron scattering directly measures the magnetic excitation spectrum, i.e., the dynamic structure factor  $S(\mathbf{Q}, \omega)$ , thereby enabling the extraction of exchange parameters, magnetic anisotropy, and spin gaps. These methods have enabled important advances in altermagnets (e.g., the observation of magnon chirality splitting in MnTe), quantum magnets (e.g., the Bose-Einstein condensation of bound magnons in  $\text{Na}_2\text{BaNi}(\text{PO}_4)_2$ ), single-molecule magnets, and unconventional superconductors (e.g., magnetic resonance modes in iron-based and nickelate superconductors). However, several key challenges remain, including weak magnetic signals arising from limited neutron flux and small sample volumes, the trade-off between resolution and intensity, strong neutron absorption by elements such as Gd and Sm, high incoherent background from hydrogen-containing compounds, the difficulty of characterizing thin-film magnetic structures, and the complexity of in situ experiments under extreme conditions such as low temperature, high pressure, and high magnetic field. Moreover, the data reduction and inverse modeling required for systems with multi- $q$  magnetic orders, coexisting short-range and long-range correlations, and multi-domain effects demand advanced algorithms and high-performance computing. Looking ahead, the integration of neutron scattering with complementary techniques, such as synchrotron X-ray scattering, muon spin relaxation, nuclear magnetic resonance, and Lorentz transmission electron microscopy, will enable multi-scale and multimodal cross-validation. The emergence of altermagnets and other newly proposed magnetic concepts offers fresh opportunities for polarized neutron studies. Artificial intelligence and machine learning are expected to accelerate the determination of magnetic structures from scattering data. Meanwhile, next-generation neutron facilities, such as the China Spallation Neutron Source Phase II (CSNS-II), the European Spallation Source (ESS), and the Spallation Neutron Source Second Target Station (SNS STS), will significantly enhance neutron flux and instrumental resolution. In particular, CSNS-II will increase the beam power from 185 kW to 500 kW, enabling the routine characterization of weak magnetic signals, small samples, and rapid dynamic processes. Overall, neutron scattering, empow-

ered by instrumental innovations, multimodal collaborations, and data-driven methodologies, is expected to play an even more central role in uncovering exotic magnetic phenomena and advancing condensed matter physics.

**Keywords:** neutron scattering, magnetic structure, magnetic materials

录用稿件，非最终出版稿